

A kutatási eredmények bemutatása

OTKA nyilvántartási száma: T038191

Témavezető neve: László István

Téma: Atomi topológiai elrendeződés: a potenciális energia és az elektronszerkezet kapcsolata

A következő témákban folytattunk kutatásokat:

1. Fullerének és nanocsövek geometriai és elektronszerkezeti tulajdonságai. (14 közlemény)
2. Új inverz szórási módszerek kifejlesztése (7 közlemény)
3. Amorf szilícium és kalkogén üvegek szerkezetének vizsgálata (9 közlemény)
4. Kvantum információelméleti kutatások (8 közlemény)
5. Vékony rétegek mágneses tulajdonságai (1 közlemény)

A továbbiakban röviden ismertetem mindegyik közleményt és hivatkozom az OTKA közlemények listájára.

Fullerének és nanocsövek geometriai és elektronszerkezeti tulajdonságai

Topológiaiilag meghatározott elektron energiaszintek és párosítási problémák [2]

Korábban bebizonyítottuk, hogy léteznek olyan elektron energiaszintek, amelyek értéke szoros kötésű közelítésben nem függ a Hamilton mátrix nem diagonális és nullától különböző mátrixelemeitől. Létezésüket a nulla értékű nem diagonális mátrix elemek eloszlása biztosítja és értéküket pedig a diagonális mátrixelemek értékei határozzák meg. Megmutattuk, hogy ezen topológiaiilag meghatározott energiaszintek létét biztosító követelmény Tutte egyik alapvető 2 párosítást leíró gráfelméleti tételének egy új alkalmazása és kibővítése.

Folytonos szimmetria és kiralitás mértékek fullerénekre [3]

Rendszerint a molekulák szimmetriáját szimmetria csoportjukkal írjuk le. Megadtunk egy függvényt, amely a $[0,1]$ zárt intervallumot képezi le a szimmetriacsoportok halmazára. Megmutattuk, hogy ha ismerjük az atomok Descartes koordinátáit ezen függvénnyel írhatjuk le az adott fullerén szimmetriáját.

Topológiai forgatási erősségek alkalmazása fullerének kiralitásának leírására [6]

Egy gráfelméleti eljárást javasoltunk királis poliéderek, poliéder alakú molekulák vagy gráfok kiralitásának leírására és enantiomerjeinek megkülönböztetésére függetlenül a csúcsok adott számozásától. Model Descartes koordinátákat és forgatási erősségeket kaptunk csupán a szomszédsági információk felhasználásával. Előjeles kiralitás értékeket adtunk a megfelelő Schlegel diagramoknak és a megfelelő három dimenziós koordinátáknak. Ezzel egyértelmű eljárást adtunk enantiomerek megkülönböztetésére.

Topológiai koordináták deformált nanocsövekre [8]

Kiindulva a szénatomok topológiai elrendeződéséből megadtunk egy algoritmust Descartes koordináták előállítására. A végső szerkezetet molekula mechanikai módszerrel kaptuk meg. Toroidális, vagy spirális szerkezeteket kaptunk attól függően, hogy az ötszögek és hétszögek hogyan helyezkedtek el a parallelogramma alakú szuper cellában.

Deformált nanocsövek geometriai szerkezete és a topológiai koordináták [9]

Megmutattuk a kapcsolatot a fullerének és nanocsövek leírására használt topológiai koordináta módszer és a matematikában alkalmazott, gráfok null téren történő beágyazása között. Példákat adtunk csőszerű helikális és toroidális nanocsövek generálására a topológiai koordináta módszer segítségével. A topológiai koordináta módszer csupán a szénatomok szomszédsági viszonyait használja ki és ebből generál három dimenziós Descartes koordinátákat.

Nanocsövek elektronszerkezete és a szénatomok topológiai elrendeződése [12]

Haeckeli szerkezetekre alkalmaztuk a topológiai koordináta módszert. A Haeckeli szerkezeteket bevezető Terrones et al. (Phys. Rev. Lett. **84**, 1716 (2000)) közlemény Haeckeli szerkezetein leap-frog transzformációt hajtottunk végre és azt tapasztaltuk, hogy az így kapott szerkezetek továbbra is Haeckel-iek maradtak, de félvezető tulajdonságokkal rendelkeztek szemben Terrones et al. állításával, hogy az ilyen szerkezetek mindig vezetők.

Topológiai megfontolások túl a Hückel elméleten [13]

Összefoglaltuk a topológiaiilag meghatározott elektronállapotok tulajdonságait és kapcsolatát gráfelméleti fogalmakkal. Megmutattuk, hogy a molekulák topológiai tulajdonságaiból az általánosabb szoros kötésű, félempírikus módszerek elektronszerkezeti tulajdonságaira is lehet következtetni. Korábbi munkák ilyen következtetések levonására az egyszerűbb Hückel elméletet szokták alkalmazni.

Topológiai koordináták nanocsövekre [14]

Amíg fullerének topológiai koordinátáinak elkészítésére három kétlebenyű sajátfüggvényt szoktunk felhasználni, nanocsövek esetében ezen koordináták előállítására négy kétlebenyű sajátfüggvény szükséges. Megmutattuk, hogy nanocsövek topológiai koordinátáit is megkaphatjuk három kétlebenyű sajátfüggvényből, ha a cső két végét két-két fél fullerénnel lezárjuk.

Nem hatszöges szén nanocsövek elektronszerkezete [15]

Hatszöges nanocsövek elektronszerkezetét legegyszerűbben az úgynevezett feltekerési módszerrel kaphatjuk meg a grafit elektronszerkezetéből. Megmutattuk, hogy a topológiai koordináta módszerrel ez megtehető olyan szerkezetekre is, amelyek a hatszögek mellett más sokszögeket, például ötszöget és/vagy hétszögeket tartalmaznak.

Topológiai koordináták fullerének és más síkbeli gráfok Schlegel diagramjának előállítására [24]

Kiterjesztettük a topológiai koordináta módszert háromszorosan összefüggő síkbeli gráfok topológiai koordinátáinak meghatározására. Ezen gráfok kétdimenziós ábrázolását egyedül a szomszédsági viszonyok felhasználásával kaptuk meg. A módszert Schlegel diagramok előállításával mutattuk be.

Szénatomok egy lehetséges elrendeződése nanocső csatlakozásoknál [25]

Hengerek áthatásának megszerkesztését felhasználva bemutattunk egy algoritmust, amely segítségével nanocső csatlakozást generálhatunk tetszőleges kiralítású nanocsövek között.

Egyfalú szén nanocső csatlakozások topológiai leírása és szerkesztése [26]

Euler tételét felhasználva megadtunk egy összefüggést nanocső csatlakozásokban található különféle sokszögek számára. Megmutattuk, hogy egy három végű csatlakozás létrehozására a legegyszerűbb esetben 6 hétszögre van szükségünk. Kifejlesztettünk egy eljárást nanocső csatlakozások Schlegel diagrammal történő leírására.

Hengerek áthatásával kapott nanocső csatlakozások geometriai és elektronszerkezeti tulajdonságai [33]

Kiszámoltuk az elektronállapotok lokális állapotsűrűségét négy különböző csatlakozásra ugyanazon két nanocső között. Megállapítottuk, hogy két nanocső esetén különféle geometriai csatlakozások és így ennek megfelelően különféle tulajdonságú elektronállapotok készíthetők.

Szén nanocső csatlakozások szerkesztése [34]

Hengerek áthatásán alapuló nanocső csatlakozások esetén csak két nanocsövet tudunk összekapcsolni, és csak úgy hogy az egyik cső leágazik a másiktól.

Diszkrét sokaságok alkalmazásával kifejlesztettünk egy eljárást, amivel nanocső csatlakozásokat készíthetünk tetszőleges kiralítású három nanocső között. Ezzel megoldottuk tetszőleges nanocső elágazások szerkesztésének a problémáját.

Új inverz szórási módszerek kifejlesztése

Optikai és atomi szolitonok közötti kapcsolat [1]

Felhasználva azt a feltevést, hogy a külső potenciál módosítja mind a szolitonok amplitúdóját és mind a fázisát is, transzformációs formulákat dolgoztunk ki a csatolt nem lineáris Schrödinger-egyenlet és a csatolt Gross-Pitaevskii egyenlet megoldásai között.

A Cox-Thompson inverz szórás probléma megoldása fázis tolások véges halmazának alkalmazásával [7]

Bár a Schrödinger-egyenlet inverz szórás problémája centrális potenciállal már megoldott rögzített energián, az elmélet nem alkalmazható gyakorlatban, mert olyan kísérleti adatokat igényel, melyek nem hozzáférhetők. Ezen problémára Cox és Thompson olyan nem lineáris egyenleteket vezetett le, melyek véges adathalmazt használnak fel. Annak ellenére, hogy ezen egyenleteket már 1970-ben felírták, még nem oldották meg őket véges fázistolások halmazán. Ezen munkánkban ezt a megoldást adtuk meg.

Két komponensű Bose-Einstein kondenzátumok statikus szoliton gerjesztéseinek stabilitása az összetevők közötti a_{12} szórási hossz véges tartományában [11]

Egy egyszerű eljárást javasoltunk szoliton gerjesztések vizsgálatára két komponensű Bose-Einstein kondenzátumok kezelésére. Azt tapasztaltuk, hogy az összetevők közötti a_{12} szóráshossz egy érzékeny paraméter két komponensű Bose-Einstein kondenzátum létezésének a megállapítására.

Elektron gáz fékezőképessége nehéz, egységnyi töltésekre: Modellek kinetikus közelítésben [16]

Degenerált elektron gázban állandó sebességgel mozgó nehéz egységnyi töltések egységnyi útra vonatkozó energia veszteségét számoltuk ki a kinetikus elmélet keretében. Azt tapasztaltuk, hogy fémes elektron gázban még a legegyszerűbb ($Z = +1$ vagy -1) bejutó töltések is erős perturbációt okoznak. Ez a tény azt mutatja, hogy perturbatív módszerek szükségesek ezen problémák leírására.

Csatolt csatornás inverz szórás problémája Born közelítésben rögzített energiánál [22]

Egy új közelítő módszert vezettünk be csatolt csatornás kvantum szórás probléma invertálására lokális csatolási potenciál és rögzített energia esetére. A módszer Ramm eljárásán alapul, aki a rugalmas inverz problémát vizsgálta, és a Born közelítésben az egzakt csatolási hullámfüggvényt a szabad megoldással helyettesítette. Megadtuk a kapott potenciál hibáját az egzakt S-mátrixtól való Born közelítésben számolt eltérés függvényében.

Az összetevők közötti a_{12} szórási hossz becslése két komponensű Bose-Einstein kondenzátumok stabilitásából [23]

Bose-Einstein kondenzátum előállítása során az egyik igen fontos paraméter az a_{ij} szórási hossz amely az i -edik és j -edik típusú atomok közötti kölcsönhatást jellemzi. Bár azonos alkáli atomok közötti a_{ii} paraméterek többnyire ismertek különböző alkáli atomok közötti a_{ij} értékeket még nem mérték meg vagy még nem számolták ki. Elvben minden paraméter, beleértve az a_{12} -öt is megkapható a Thomas-Fermi egyensúlyi sűrűségi profilokból. Ez azonban elég pontatlan módszer. Mi az a_{12} paraméterekre a Gross-Pitaevskii egyenletekből kaptunk megbízható közelítő értékeket.

Valós és komplex fázis tolások invertálása potenciálokra az általánosított Cox-Thompson inverz szórás módszerrel rögzített energián [37]

Általánosítottuk a Cox-Thompson rögzített energiájú inverz szórás módszert kísérleti eredményekből kapott komplex fázis tolásokra. Új formulákat vezettünk le a fázis tolások és az eltolt impulzusmomentumok közötti kapcsolatra, melyek felhasználásával megkaptuk az inverz potenciálokat.

Amorf szilícium és kalkogén üvegek szerkezetének vizsgálata

Sávközi állapotok tulajdonságai dopolt amorf szilíciumban és szénben [4]

Különböző tetraéderes amorf szénszerkezetet tanulmányoztunk nitrogén és bór hozzáadásával. Az amorf szilícium szerkezetekhez foszfort adtunk. Ezen adalékolásokkal nem tapasztaltunk szerkezeti átalakulást. Számításainkat Hartree-Fock ab initio és fragmentum ön konzisztens tér módszerrel végeztük. Azt tapasztaltuk, hogy a szennyező atomok relatív helyzete határozza meg a sávközi állapotok tulajdonságait.

Szokatlan atomi elrendeződés amorf szilíciumban [10]

Kifejlesztettünk egy szoros kötésű molekula dinamikai számítógépes programot amorf szilícium gőz fázisú lerakódásának modellezésére. A kapott szerkezetben háromszög és négyszög alakú atomi konfigurációkat találtunk. Ezen eredményeket két független, kísérleti eredményeken alapuló vizsgálattal igazoltuk. Nagy molekulákban található Si-Si-Si fragmentumok statisztikai vizsgálata és a fordított Monte Carlo szimuláció is igazolta a háromszög és négyszög szerkezetek létét.

Kalkogén üvegek különböző előállítási módjainak összehasonlítása: szerkezetek szimulálása molekula dinamikai módszerrel [17]

A molekula dinamikai szimuláció keretében kétféle módszerrel vizsgáltuk kalkogén üvegek keletkezését. Ezen két módszer a folyadék kvencselése és a párologtatás volt. Azt vizsgáltuk, hogy a keletkezett szerkezetek hogyan függenek az alkalmazott előállítási módszertől. Az atomi szerkezetünk 1000 atomot tartalmazott és klasszikus három test kölcsönhatással vettük figyelembe a szelén-szelén kölcsönhatást. Azt tapasztaltuk, hogy a fenti két módszer különböző sűrűségű üvegeket hozott létre.

Amorf szilícium növekedése: Atomi bombázás alacsony energiás molekula dinamikai szimulációja [18]

Ezen munka fő célja amorf szilícium szerkezetek vizsgálata volt. Az atomonkénti lerakódást kilenc szerkezeten tanulmányoztuk. A tizedik szerkezetet gyors hűtéssel kaptuk. A kapott szerkezetek közötti különbségeket a keletkezett gyűrűk statisztikájával írtuk le. Kaptunk háromszög és négyszög gyűrűket is.

Fény indukált térfogati változás amorf szelénben. Molekula dinamikai szimuláció: Minta előkészítés és gerjesztés [27]

Kalkogén (szelén) üvegekben vizsgáltunk fotoindukált változásokat önkonzisztens, szoros kötésű, molekula dinamikai módszerekkel. Olyan realisztikus üvegszerű hálózatot készítettünk, amely utánozza a valódi vékony rétegeket. A mintáinkat számítógépes melegítési és hűtési módszerekkel készítettük és szisztematikusan megvizsgáltuk a fénnel indukált gerjesztésekre adott válaszokat. A fénnel való gerjesztést azzal modelleztük, hogy egy elektront raktunk a legfelső betöltött energianívóról a legalsó be nem töltött nívóra.

Amorf szelén vékony rétegek növekedése: klasszikus és kvantummechanikai szimuláció összehasonlítása [28]

Három fajta atomközi kölcsönhatást vettünk figyelembe molekula dinamikai szimulációnk során. Az egyik klasszikus három test kölcsönhatású empírikus potenciál volt, a másik kettő pedig szoros kötésű kvantummechanikai potenciál. Az egyes potenciálokkal kapott szerkezetek lényegesen különböztek a következő paraméterek összehasonlítása során: radiális eloszlás függvény, kötés szögek, dihedrális szögek és koordinációs hibák. Összességében a Hubbard tagot tartalmazó szoros kötésű módszer adta a legjobb eredményt. Ha nem vettük figyelembe ezt a tagot, sok lett a koordinációs hibák száma.

A párologtatott és az ion implantált amorf szilícium minták szerkezetének összehasonlítása [29]

Olyan amorf szilícium szerkezetek struktúra faktorait modelleztük fordított Monte Carlo módszerrel, melyeket radikálisan különböző módszerekkel készítettek. Megmutattuk, hogy nincs lényeges mikro szerkezetű különbség a párologtatással és az ion implantációval kapott szerkezetek között. A hibahatáron belüli reprodukció érdekében szükséges volt feltennünk 75 fok körüli kötőszögek létezését is. A várakozásnak megfelelően, az ion implantált szerkezetet rendezettebbnek találtuk.

Fotoindukált térfogati változás amorf szelénben [35]

Magyarázatot adtunk kalkogénid üvegek fotoindukált térfogati változására. Azt tapasztaltuk molekula dinamikai szimulációinkban, hogy elektron gerjesztések a kovalens kötések felszakadását adják és a lyukak pedig láncközi kötések hoznak létre ott, ahol az elektronok, illetve a lyukak lokalizálva vannak. A fotoindukált kötés elszakadás és a láncközi kötés létrejötte közötti összjáték eredményezi a térfogati növekedést vagy csökkenést. A fotoindukált térfogati változásra adott magyarázatunk kiváló összhangban van a szelénen kapott felületi magasság legújabb és első mérési adataival.

Fotoindukált térfogati változások univerzális tulajdonságai kalkogén üvegekben [36]

Kalkogén üvegekben megvilágítás hatására létrejövő mikroszkopikus folyamatokat vizsgáltunk szoros kötésű molekula dinamikai módszerrel. Egymástól függetlenül tárgyaltuk a foton abszorpciója után létrejövő gerjesztett elektront és lyukat. Amikor az elektronok gerjesztését vizsgáltuk kötések elszakadását tapasztaltuk, amikor pedig a lyukakat tárgyaltuk, láncok közötti kötések jöttek létre. Eredményeink alapján meg tudjuk magyarázni mind a térfogati tágulást és az összehúzódást is. Eredményeink megegyeznek a legújabb kísérleti eredményekkel.

Kvantum információelméleti kutatások

SL(2,C) szimmetriájú szórás egzaktul megoldható modelljei [5]

A sokcsatornás szórási probléma két egzaktul megoldható modelljét vizsgáltuk. Az első a konstans negatív görbületű Poincaré felső félsíkján nem relativisztikusan szóródó töltött részecskét tárgyalja SU(2) mérték térben. A második modell Morse potenciált tartalmazó mátrix értékű kölcsönhatáson vizsgál egydimenziós potenciál szórását. A bemutatott példák érdekes alkalmazást nyerhetnek kozmológiai problémák megoldásánál.

A geometriai összecsatolódás: metrika, konnekciók és a geometriai fázis [20]

Megmutattuk, hogy két qubit összefonódottságát tisztán geometriai módon jellemezhetjük a Hopf fibrálás segítségével. Levezettük, hogy az összefonódottság mértékei a négydimenziós gömbön adott kanonikus metrikával kifejezhetők. A szokásos Schmidt dekompozíciónak geometriai értelmezést adtunk. Definiáltuk a holonomikus kvantumszámítógép elvén alapuló kvantum kapukat.

Thomas rotáció és a kevert állapotú geometriai fázis [21]

Meghatároztuk a geometriai fázist olyan rendszerekre, melyek állapotát 2×2 –es sűrűségmátrixok jellemzik. A zárt görbéket eddig még nem tanulmányozott tetszőleges geodetikus háromszögeknek választottuk. Az eredményt a kvantuminformációelméletből ismert úgynevezett fidelitással fejeztük ki. Megmutattuk, hogy a kevert állapotokra érvényes geometriai fázis kifejezhető a tiszta állapotokra érvényes nem-Abeli geometriai fázis segítségével.

N-qubit összefonódott monotonok egy osztályának geometriája [30]

Olyan N-qubit összefonódott monotonok családját definiáltuk, amely invariáns stochasztikus lokális műveletekre és klasszikus kommunikációra. Ezen család tartalmazza a korábban definiált ismert példákat összefonódott állapotokra. Konstrukciónk a Hilbert tér kettős partícióján alapul. Ezen partícióknak egy szemléletes geometriai interpretációt adtunk a Grassmann sokaságok fogalmainak a segítségével.

Három-qubit összefonódottság geometriája [31]

Három-qubit összefonódott állapotok geometriai leírását adtuk meg. A qubitek sztochasztikus lokális műveleteit és a klasszikus kommunikációt úgy tekintettük, mint egy mérték szabadsági fokát. Az összefonódott állapotokat a twistor elméletből ismert Klein négyesek pontjaival reprezentáltuk.

Elemi formula fermion rendszerek összefonódottsági entrópiájára [32]

Négy egyrészecske állapottal rendelkező kételektronos rendszerek kvantum korrelációját írtuk le a Neumann és a Rényi –féle entrópiák formuláival. Érdekes geometriai szerkezetet találtunk a fermion összefonódottságra és kapcsolatot állapítottunk meg az általánosított Pauli elvvel.

Négy-qubit invariánsok geometriája [38]

Megmutattuk, hogy a négy-qubitek polinomiális invariánsai a CP^3 komplex projektív tér négy pontjának, hat egyenesének és négy síkjának felelnek meg. Sztochasztikus lokális operátorok és klasszikus kommunikáció elemi összefonódottsági osztályára ezen invariánsok nagyon egyszerű alakot vesznek fel, mely kapcsolatba hozható az elemi szimmetrikus négy változós polinomokkal.

Fonalas fekete lyukak és az összefonódottság geometriája [39]

Érdekes hasonlóságot találtunk az elméleti fizika két különböző területe között, mint a kvantum információ elmélet és a fonalas fekete lyukak tulajdonságai. Megmutattuk, hogy matematikai szempontból hasonlóság van az STU modellben számolt makroszkópikus fekete lyuk tanulmányozása során kapott modulusok befagyott értékei és a dyonikus töltésekkel definiált három qubites összefonódott állapotok kanonikus alakja között.

Vékony rétegek mágneses tulajdonságai

Vékony rétegek alacsony energiás gerjesztéseinek első elveken alapuló teljesen relativisztikus vizsgálata [19]

A réz (001) felületre rakott kobalt monoréteg magnon spektrumának hosszú hullámhosszú viselkedését vizsgáltuk első elveken alapuló módszerrel. A Dzyaloshinsky-Moriya típusú kölcsönhatásnak megfelelő aszimmetriát találtunk a mágnesezésre merőleges magnon diszperziós reláció lineáris tagjába.